

# Física Moderna II

## Aula 10

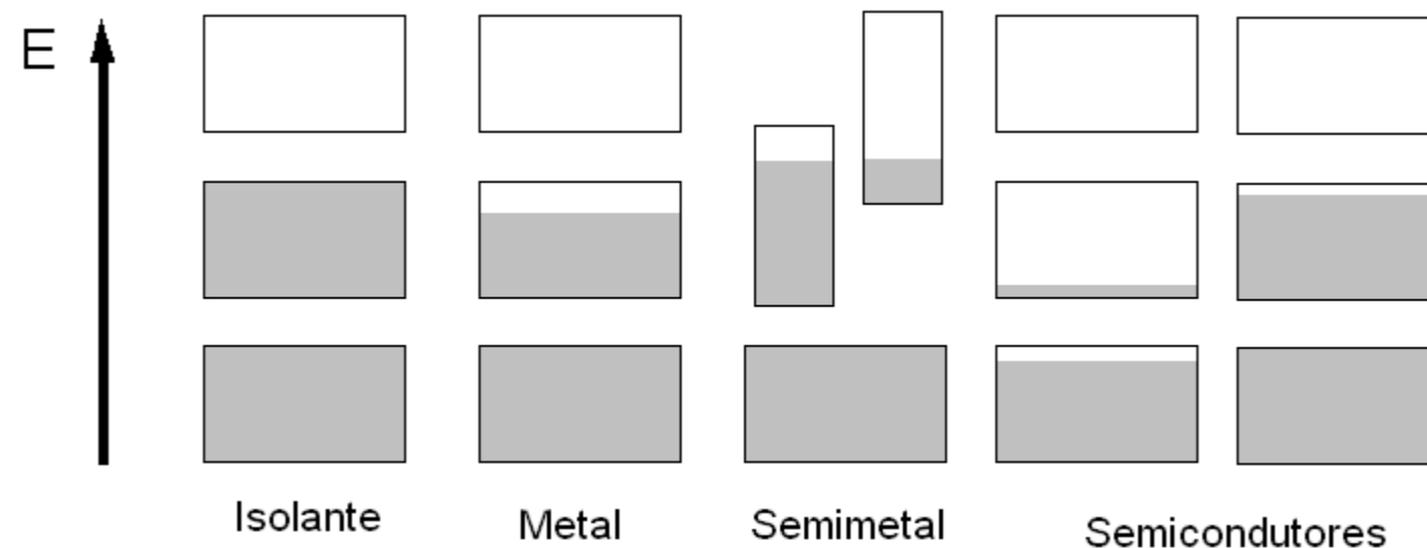
Marcelo G Munhoz  
Pelletron, sala 245, ramal 6940  
[munhoz@if.usp.br](mailto:munhoz@if.usp.br)

# Teoria de Banda dos Sólidos

- A formação e a ocupação dessas bandas define se um sólido será um condutor ou um isolante
- Como compreender as propriedades elétricas de um sólido, isto é, se ele é condutor ou isolante, a partir da configuração de suas bandas e da ocupação das mesmas?

# Teoria de Banda dos Sólidos

- Isolante: as bandas estão ou completamente cheias ou completamente vazias
- Condutor: alguma banda está parcialmente cheia
- A ocupação das bandas depende do número de elétrons de valência nas unidades do sólido

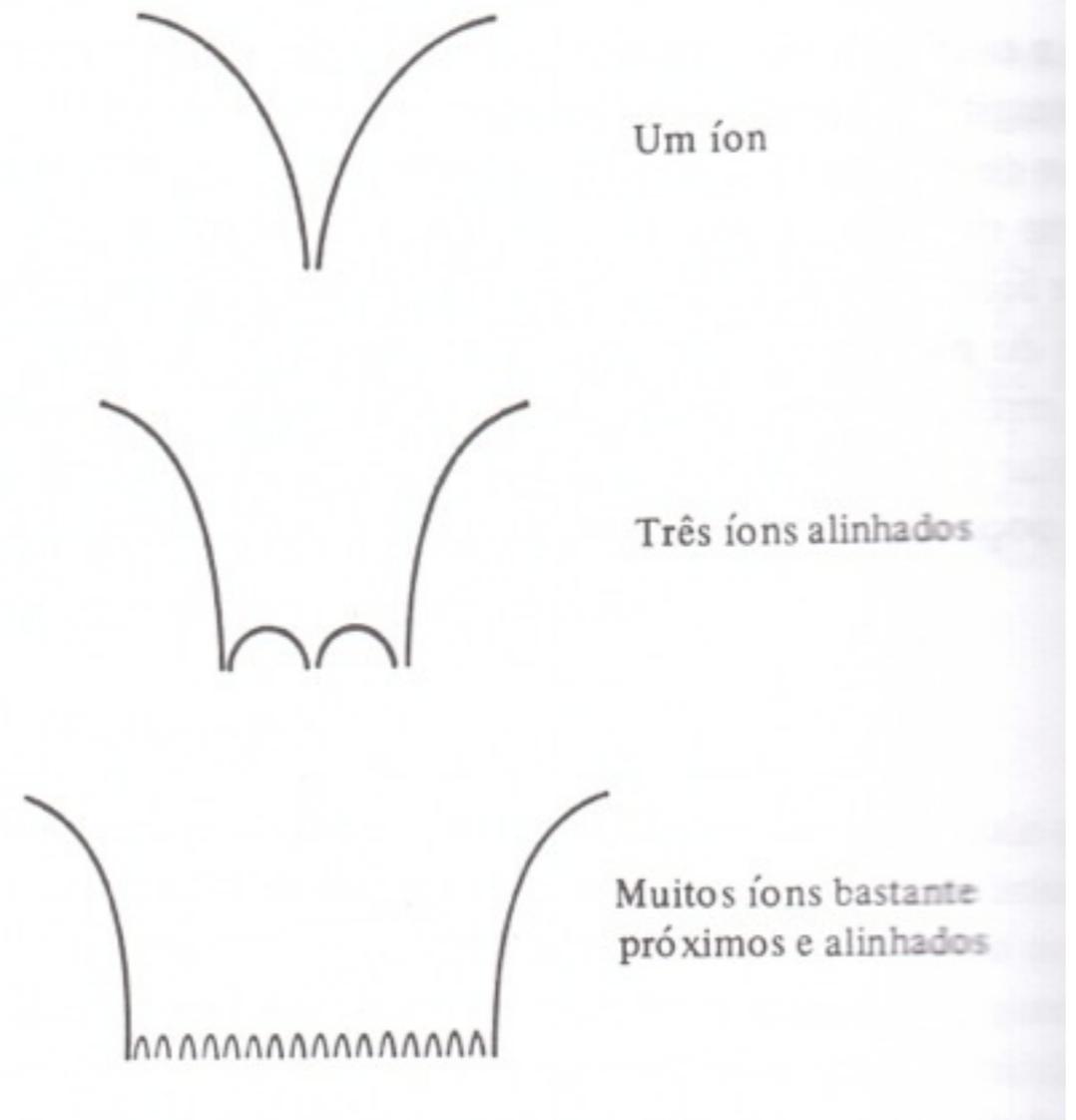


# Teoria de Banda dos Sólidos

- Portanto, o tamanho e ocupação das bandas é essencial para determinar o comportamento elétrico de um sólido
- Como determinar o tamanho e a ocupação das bandas de um sólido?

# Gás de Elétrons Livres

- Neste modelo, considera-se que os elétrons que ocupam parcialmente uma banda, chamada de banda de condução, estão livres, formando um gás de férmions
- É possível estimar a ocupação e a largura da banda de condução com este modelo



# Partícula presa em uma “caixa”

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

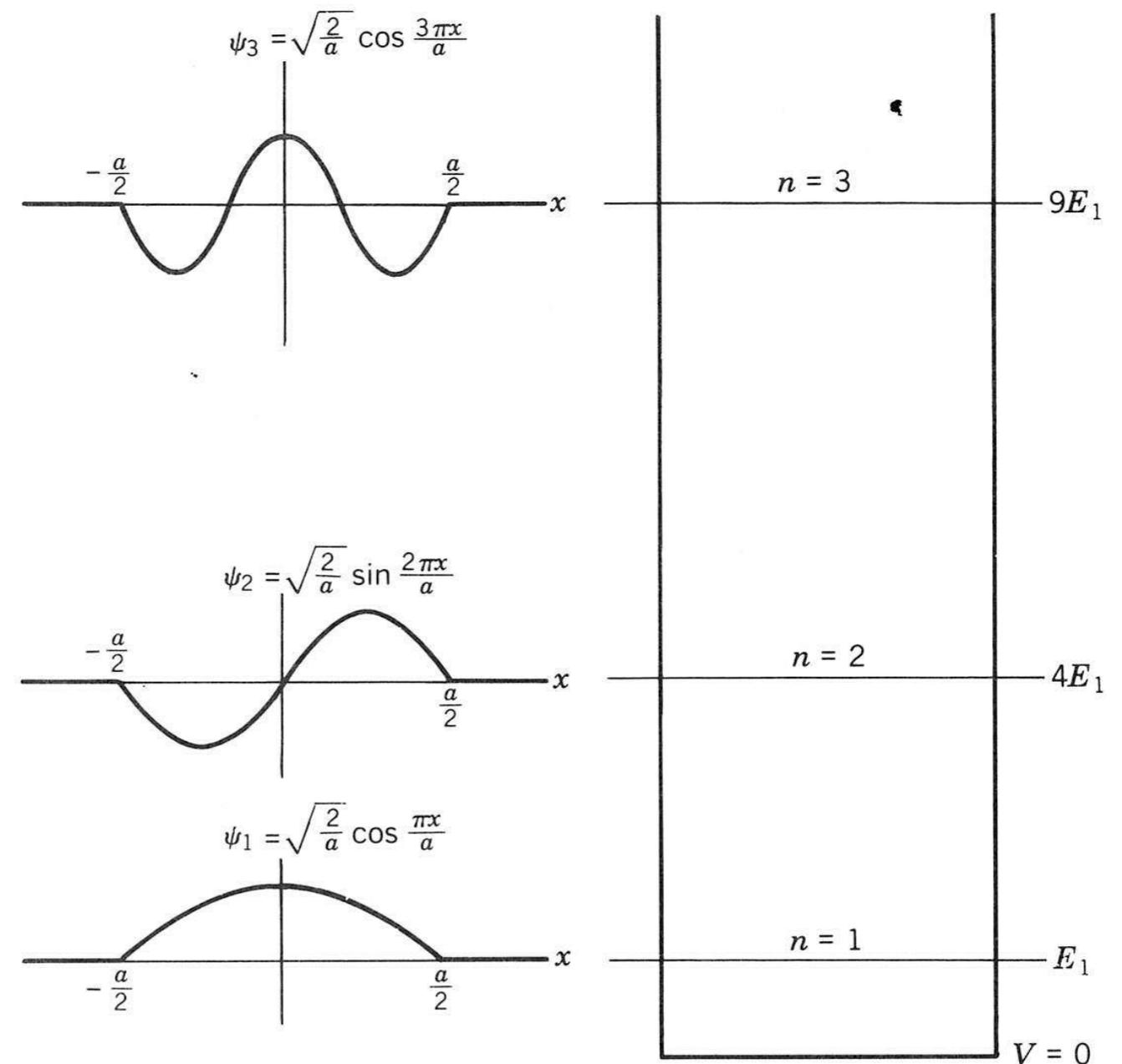
para  $n=1,3,5,\dots$

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

para  $n=2,4,6,\dots$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

para  $n=1,2,3,4,\dots$

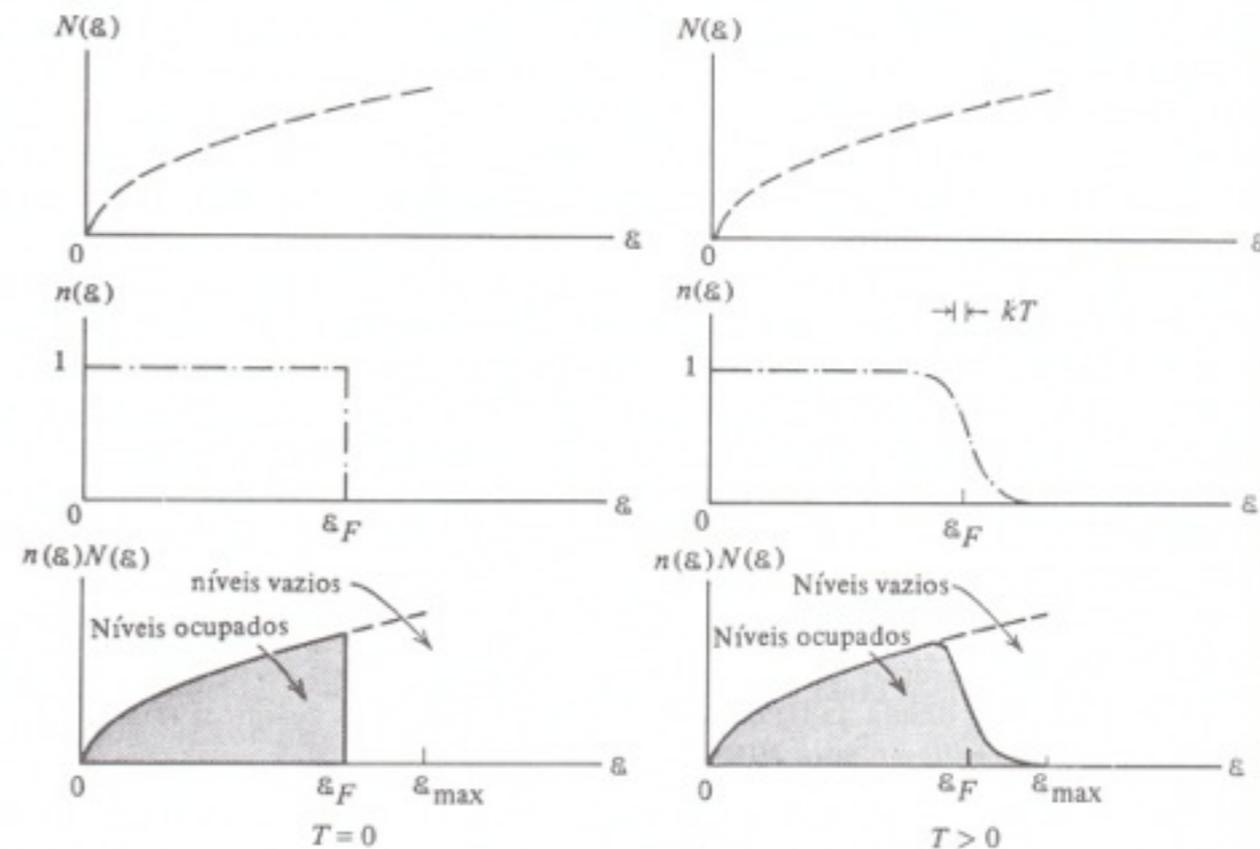


# Gás de Elétron Livres

- Neste modelo, a ocupação de uma banda será dada pelo número de estados disponíveis  $N(\epsilon)$  vezes a ocupação esperada para cada estado  $n(\epsilon)$  sendo:

$$N(\epsilon) = \frac{8\pi V}{h^3} (2m^3)^{1/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon$$

$$n_{Fermi}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \epsilon_F)/kT} + 1}$$

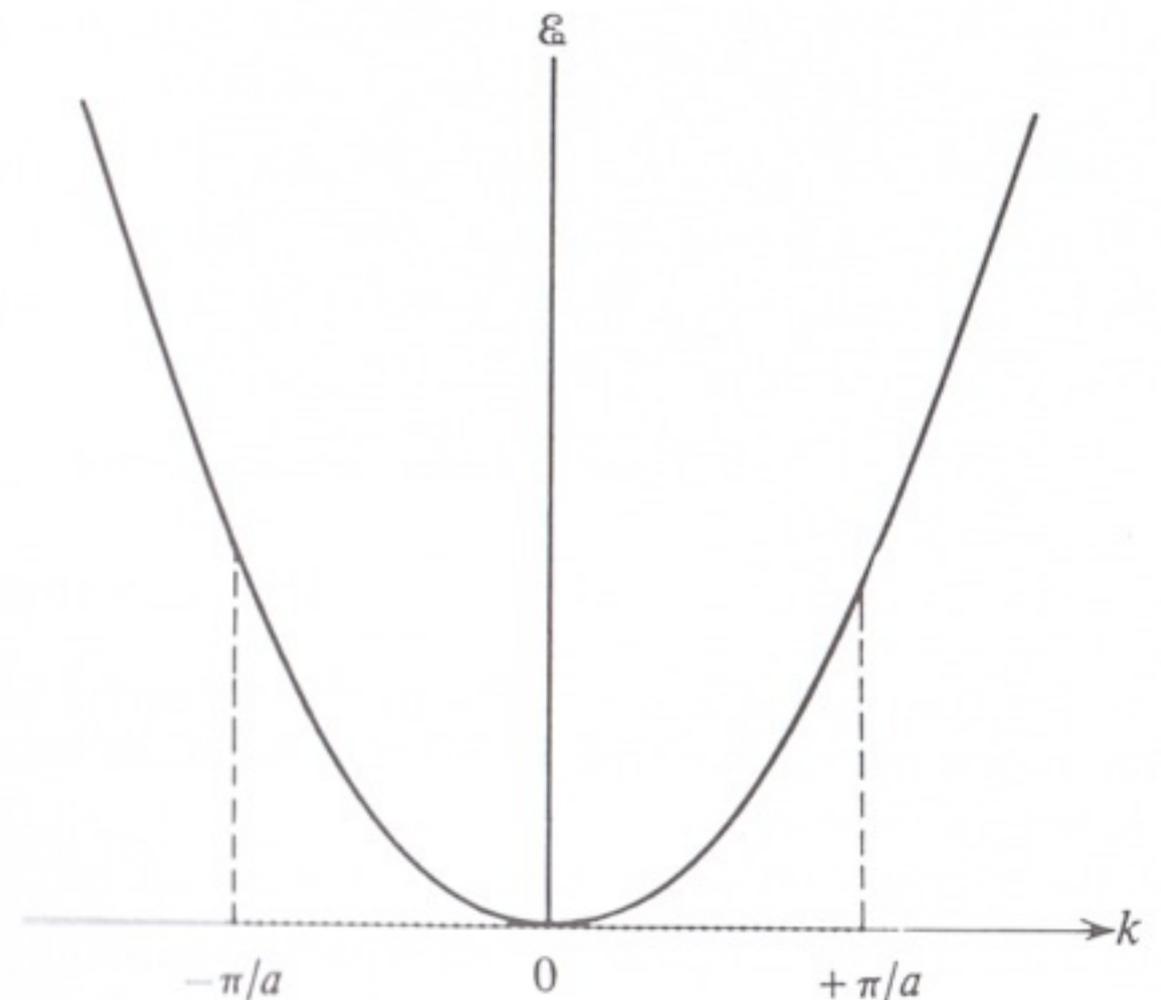


# Gás de Elétron Livres

- E ele permite calcular a largura banda a partir da energia máxima permitida, que é dada por:

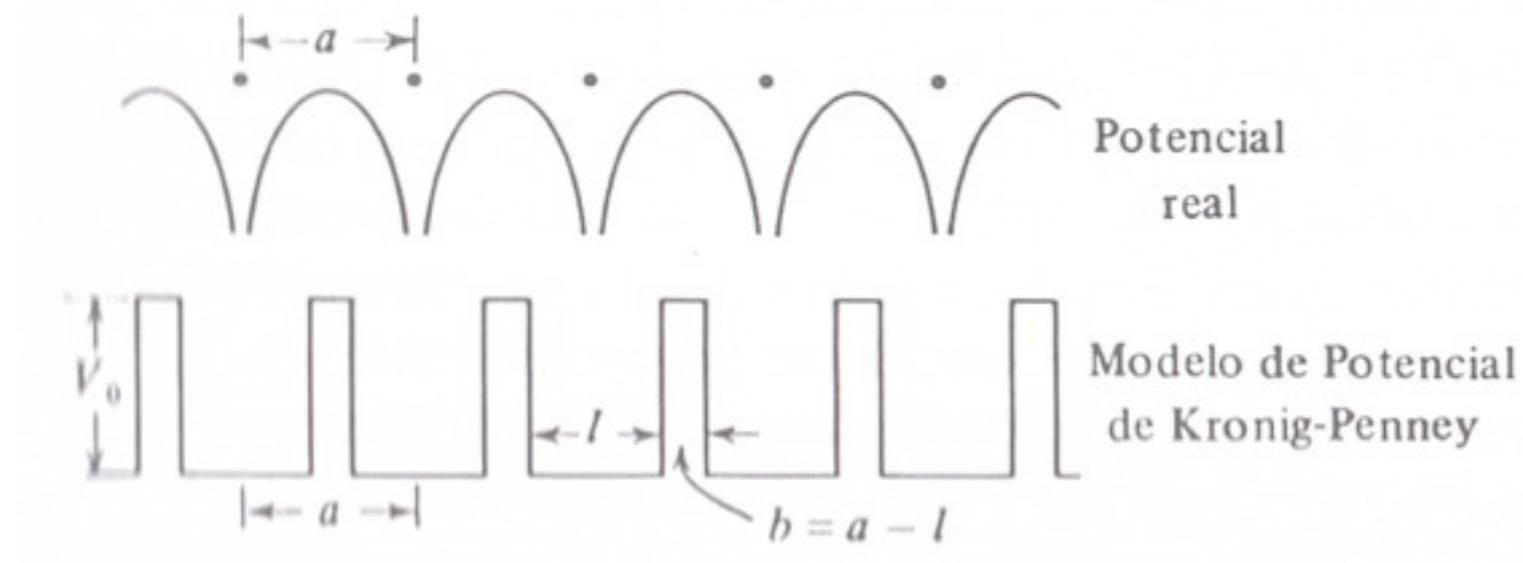
$$\begin{aligned}\epsilon_{max} &= \frac{h^2 N^2}{8mL^2} = \frac{h^2 L^2}{8mL^2 a^2} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\end{aligned}$$

- que leva a:  $-\pi/a \leq k \leq +\pi/a$



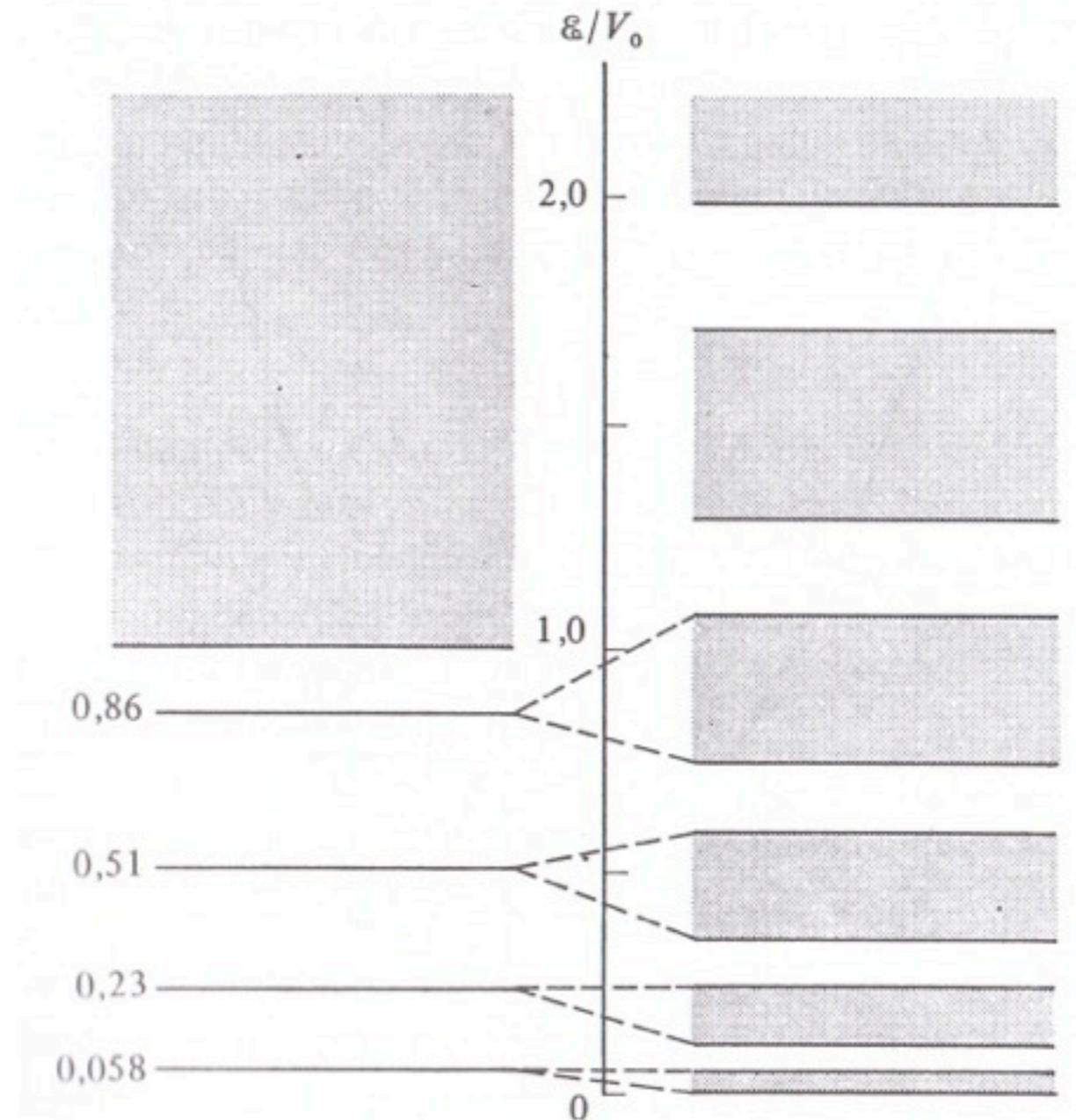
# Modelo de Kronig-Penney

- Neste modelo, considera-se a presença dos ions que dão origem à uma rede periódica de potenciais quadrados e barreiras de potencial



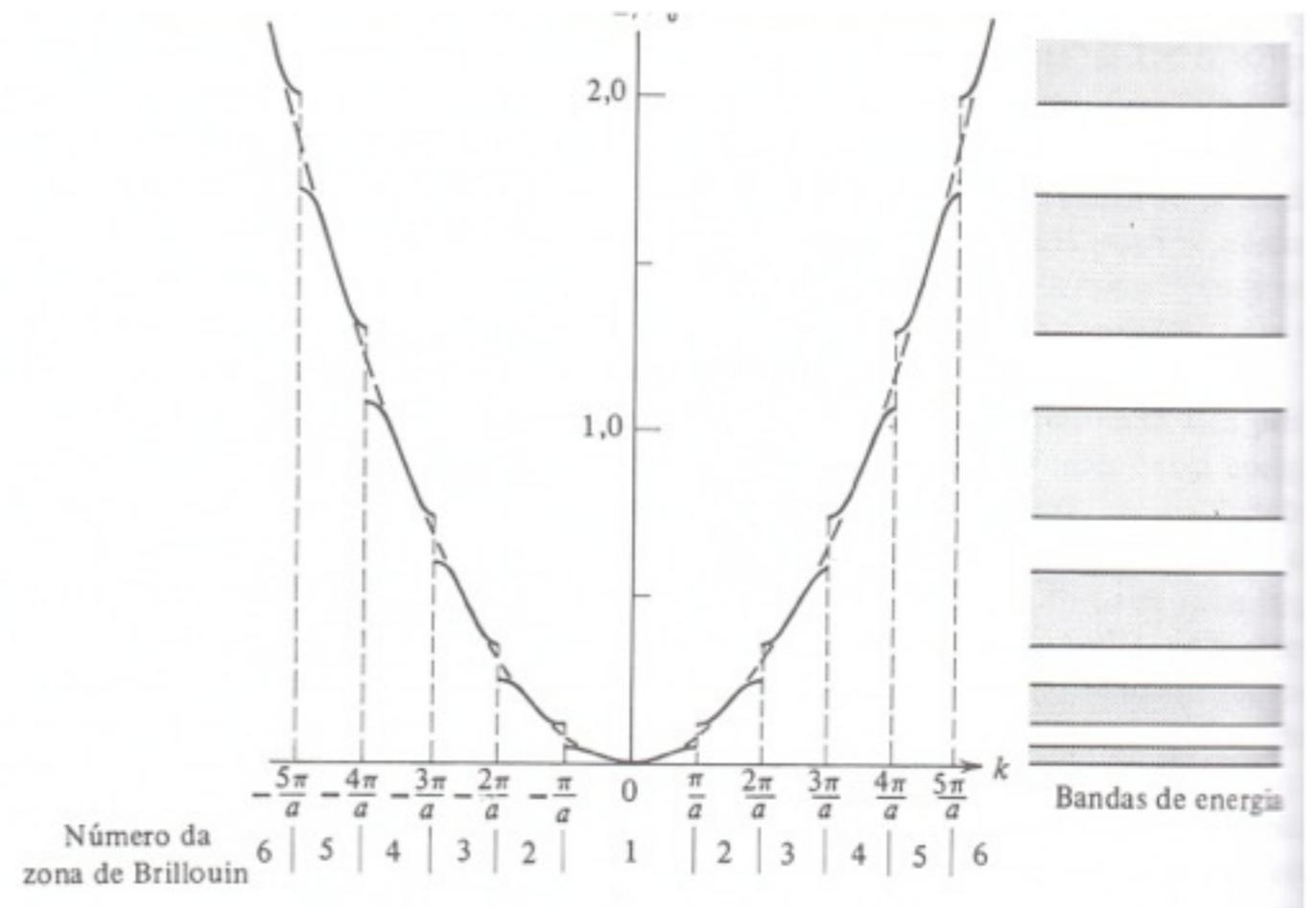
# Modelo de Kronig-Penney

- A rede periódica de potenciais quadrados e barreiras de potencial faz surgir as bandas com intervalos entre elas devido à interferência dos elétrons



# Modelo de Kronig-Penney

- A rede periódica de potenciais quadrados e barreiras de potencial faz surgir as bandas com intervalos entre elas devido à interferência dos elétrons



# Condutividade

- Como descrever o comportamento dos elétrons em uma banda de condução quando um campo elétrico é aplicado?
  - Descrição clássica
  - Massa efetiva

# Massa Efetiva

- Pode-se descrever o movimento dos elétrons de condução em um sólido sob a ação de um campo elétrico a partir de uma massa efetiva dada por:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{qE}{m^*}$$

- onde:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon}{dk^2}$$

